Tarea 2

Fecha de entrega: 30 de Agosto

Profesor: Felipe Barra De La Guarda
Auxiliar: Matías Araya Satriani
Ayudantes: Astor Sandoval Parra

P1. Entropía de un Cristal

Considere una idealización de un cristal que tiene N sitios y el mismo número de sitios intersticiales (lugares intermedios entre sitios del cristal que pueden albergar átomos), el cristal posee una cantidad N de átomos. Sea ϵ la energía necesaria para mover un átomo desde un sitio de la red cristalina a un espacio intersticial. Determine la entropía en función de la energía total E.

Hint: Debe expresar la cantidad de átomos n en los sitios intersticiales. La energía total del cristal es $E = n\epsilon$.

Modelo de Ising

El modelo de Ising es un modelo físico usado para la explicación de diversos fenómenos. En su versión más común el modelo se trata de un sistema magnético. Consideremos el modelo unidimensional. Imagine $N \gg 1$ spines equiespaciados en una circunferencia, cada uno de los cuales puede tener dos estados, $\sigma_i = \pm 1$. La energía en el modelo de Ising en ausencia de campos magnéticos externos es simplemente:

$$E = -\sum_{\langle ij \rangle} J\sigma_i\sigma_j \tag{1}$$

donde $\sum_{\langle ij \rangle}$ es una suma a primeros vecinos, es decir; al tomar un spin, la energía que aporta al sistema depende de los spines inmediatamente vecinos. Asuma a continuación que $J > 0$. De esta forma el estado basal tiene degeneración dos y corresponde a todos los spines orientados de igual forma, ya sea $+1$ o -1.

1. Encuentre la entropía $S(E)$ en función de la energía E de la cadena de spines.
2. Haga un gráfico de $S(E)$ en todo el rango permitido de energías.

Entropía de Shannon

Se busca encontrar la única función (con libertad de la constante k_b) que satisface las tres propiedades clave de la entropía:

$$S\left(\frac{1}{\Omega}, \ldots, \frac{1}{\Omega}\right) > S\left(p_1, \ldots, p_\Omega\right) \quad \text{excepto si } p_i = \frac{1}{\Omega} \text{ para todo } i, \tag{2}$$

$$S\left(p_1, \ldots, p_{\Omega-1}, 0\right) = S\left(p_1, \ldots, p_{\Omega-1}\right) \tag{3}$$

y

$$\left\langle S\left(A \mid B_\ell\right)\right\rangle_B = S(AB) - S(B) \tag{4}$$

donde $S(A) = S\left(p_1, \ldots, p_\Omega\right), S(B) = S\left(q_1, \ldots, q_M\right)$, $\left\langle S\left(A \mid B_\ell\right)\right\rangle_B = \sum_\ell q_\ell S\left(c_{1\ell}, \ldots, c_{\Omega\ell}\right)$ y $S(AB) = S\left(c_{11}q_1, \ldots, c_{\Omega M}q_M\right)$.
Por conveniencia se define $L(g) = S(1/g, \ldots, 1/g)$.

1. Para cualquier probabilidad q_ℓ racional, sea g el múltiplo menos común de los denominadores, y sea $q_\ell = g_\ell/g$ para enteros g_ℓ. Muestre que:

$$S(B) = L(g) - \sum_\ell q_\ell L\left(g_\ell\right) \tag{5}$$

Hint: Considere que AB tiene g posibilidades con probabilidad $1/g$ de, que B identifique un grupo de tamaño g_ℓ, y A de identificar el miembro g_ℓ del grupo ℓ. Esto se ejemplifica en la Figura 1.

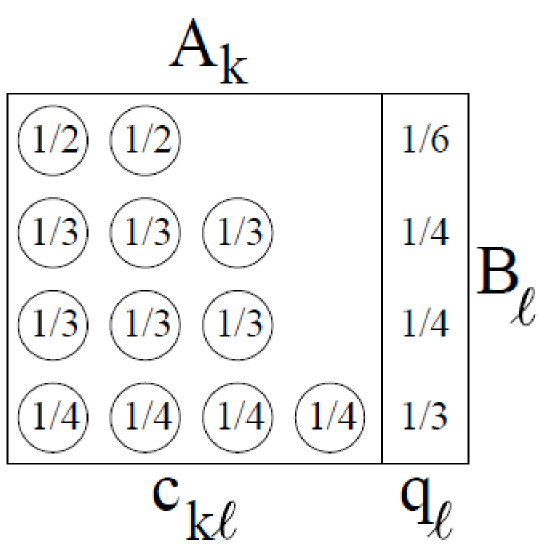

Figura 1: Aquí las probabilidades $q_\ell = (1/6, 1/3, 1/3, 1/2)$ de estado B_ℓ son racionales. Podemos dividir la probabilidad total en $g = 12$ partes iguales (circulitos, cada uno con probabilidad $r_{k\ell} = 1/12$), con $g_k = (2, 3, 3, 4)$ partes para la medición correspondiente B_ℓ. Podemos escribir $S(B)$ en términos de las (máximas) equiprobables $L(g) = S(1/g, \ldots)$ y $L(g_k)$, y usar la propiedad de el cambio de entropía para probabilidades condicionales (usar la ecuación (4) para llegar a (5)).

2. Si $L(g) = k_S \log g$ muestre que la ecuación (5) es la entropía de Shannon $S_S = -k_S \sum_i p_i \log p_i$. Conociendo que $S(A)$ es la entropía de Shannon para todas las probabilidades racionales, y asumiendo que $S(A)$ es contínua, hace que $S(A)$ sea la entropía de Shannon. Entonces, hemos reducido el problema a mostrar que $L(g)$ es el logaritmo, con una libertad de constante k_s.

3. Muestre que $L(g)$ incrementa de forma monótona con g. (**Hint:** Necesitará usar las primeras dos propiedades).

4. Muestre que $L(g^n) = nL(g)$. (**Hint:** Considere n distribuciones de probabilidad independientes cada una con g eventos equiprobables. Use la tercera propiedad recursivamente en n).

5. Si $2^m < s^n < 2^{m+1}$, usando los resultados de la parte 3. y 4. muestre que:

$$\frac{m}{n} < \frac{L(s)}{L(2)} < \frac{m+1}{n}. \tag{6}$$

   Hint: ¿Cómo se relaciona $L(2^m)$ con $L(s^n)$ y $L(2^{m+1})$?
   Muestre también usando el mismo argumento que $\frac{m}{n} < \frac{\log(s)}{\log(2)} < \frac{m+1}{n}$. Usando esto, muestre que $\left|\frac{L(s)}{L(2)} - \frac{\log(s)}{\log(2)}\right| < \frac{1}{n}$ y que por lo tanto $L(s) = k \log s$ para una constante k. Concluya que la única función que cumple todas las propiedades de la entropía es la entropía de Shannon.